На правах рукописи

Jan 1

Соколов Семен Федорович

# ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ МИКРОСТРУКТУРЫ И СОПРОТИВЛЕНИЯ ДЕФОРМАЦИИ СТАЛЕЙ ПРИ ГОРЯЧЕЙ ОБРАБОТКЕ ДАВЛЕНИЕМ

Специальности:

05.16.05 – Обработка металлов давлением 05.16.01 – Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов

# АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук

Санкт-Петербург - 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Научные руководители:	Колбасников Николай Георгиевич доктор технических наук, профессор						
	Васильев Александр Александрович кандидат физико-математических наук доцент						
Официальные оппоненты:	Трайно Александр Иванович доктор технических наук, ведущий научный сотрудник ИМЕТ РАН им. А.А. Байкова						
	Зисман Александр Абрамович доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник ЦНИИ КМ «Прометей»						
Ведущая организация:	Южно-Уральский государственный университет						

Защита состоится 21 февраля 2013 г. в 16 часов на заседании диссертационного совета Д 212.229.03 при ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу: 195251, СПб, Политехническая, 29, главный корпус, ауд. 118.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Автореферат разослан «<u>17</u>» <u>января</u> 2013 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 212.229.03 кандидат технических наук

Климова Ольга Геннадьевна

### ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Горячая прокатка является важнейшей технологией промышленного производства стальной полосы различного назначения. Постоянное повышение уровня механических свойств прокатываемых сталей и внедрение в производство сталей новых марок требуют оптимизации существующих и разработки новых режимов прокатки, что стимулирует работы по исследованию и моделированию формирования структуры аустенита.

Последние десятилетия значительное внимание уделяется разработке интегральных математических моделей для прогнозирования структуры и механических свойств проката. Одной из известных компьютерных моделей такого типа является HSMM (Hot Strip Mill Model), разработанная в конце 90 годов прошлого столетия в университете Британской Колумбии (Канада). Аналогичная модель, созданная несколько позже, составляет ядро системы контроля качества горячекатаного стального листа VAI-Q Strip, успешно используемой в условиях реального производства компанией VOEST ALPINE STAHL LINZ (Австрия). Данные интегральные модели могут применяться не только для оптимизации режимов сталей, экспериментальные прокатки данные для которых калибровке моделей использованы математических при структурообразования, но и служить инструментом разработки режимов прокатки новых сталей. Эффективное использование таких моделей для новых сталей возможно, если модели процессов структурообразования адекватно учитывают влияние химического состава. В тоже время существующие в настоящее время модели рассматриваемого типа, например HSMM, не обладают этим важным качеством, поскольку составляющие их эмпирические подмодели обеспечивают требуемую точность только для набора сталей базовых марок. Соответственно, расчеты, проводимые для сталей, химический состав которых существенно отличается от базовых составов, приводят к большим погрешностям. В связи с этим создание нового интегральных моделей горячей прокатки, способных поколения реагировать на изменения содержания основных адекватно легирующих элементов, включая микролегирующие элементы (Nb, V, Ti), является важной задачей современного физического материаловедения и теории обработки металлов давлением.

На основании изложенного можно заключить, что исследование процессов структурообразования И сопротивления деформации сталей. разработка современных а также количественных математических моделей процессов этих С учётом влияния легирования, являются актуальными.

Целью работы является создание интегральной физически обоснованной математической модели для количественного описания эволюции структуры аустенита и сопротивления его деформации при горячей прокатке низко— и среднелегированных сталей с учетом влияния их комплексного легирования.

Для достижения поставленной цели в диссертации решены следующие задачи:

1. С помощью комплекса Gleeble 3800 для трех трубных сталей категории прочности X80, X90 и X100 проведены исследования:

- кинетики роста зерна аустенита в зависимости от температуры;
- напряжения пластического течения аустенита в зависимости от температуры и скорости деформации;
- кинетики статической рекристаллизации в условиях индуцированного деформацией выделения частиц карбонитридов МЛЭ в зависимости от температуры, степени и скорости деформации.

2. Получена эмпирическая формула для расчета энергии активации самодиффузии (ЭАСД) в аустените с учетом влияния содержания практически важных легирующих элементов (C; Mn; Si; Ni; Mo; Cr; Nb; Ti; V), находящихся в твердом растворе.

3. С использованием программного пакета Thermo-Calc получены эмпирические формулы, позволяющие рассчитывать произведения растворимостей, а также термодинамические движущие силы образования карбонитридов Nb, Ti и V с учетом влияния концентрации Mn и Si для практически важных диапазонов изменения температуры и химического состава трубных сталей.

4. Разработаны физически обоснованные математические модели для количественного описания кинетики:

• роста зерна в зависимости от температуры;

- динамической рекристаллизации в зависимости от температуры, размера зерна и скорости деформации;
- выделения частиц карбонитридов Nb на дислокациях деформированного аустенита;
- статической рекристаллизации в зависимости от температуры, размера зерна и параметров деформации с учетом эффектов возврата и индуцированного деформацией выделения частиц карбонитридов Nb.

5. Созданы модели для расчета напряжения пластического течения аустенита в зависимости от температуры, размера зерна и скорости деформации и прогнозирования размеров зерна после динамической и статической рекристаллизации.

6. На основании полученных экспериментальных данных в совокупности с литературными данными для сталей с химическим составом, варьируемым в широких пределах, проведена калибровка предложенных математических моделей отдельных процессов структурообразования аустенита при горячей прокатке и модели для напряжения его пластического течения.

7. Разработана интегральная модель для описания сложной эволюции структуры аустенита в результате развития совокупности взаимодействующих процессов структурообразования при заданном температурно-деформационном режиме горячей прокатки, а также реализующая ее компьютерная программа AusEvol+.

8. Выполнено физическое моделирование горячей прокатки ряда сталей по режимам стана 2000 ОАО «Северсталь». На основании полученных данных по размерам зерна аустенита на разных стадиях моделируемой прокатки проведена верификация интегральной модели структурообразования.

Результаты, характеризующиеся научной новизной:

1. Создана интегральная модель для описания сложной эволюции структуры аустенита в результате развития совокупности взаимодействующих процессов структурообразования при заданном температурно-деформационном режиме горячей прокатки низко- и среднеуглеродистых сталей, включая микролегированные трубные стали.

2. Разработан набор физически обоснованных математических моделей процессов формирования структуры аустенита при горячей прокатке низко- и среднеуглеродистых сталей с учетом влияния их комплексного легирования элементами замещения (Mn; Si; Ni; Mo; Cr; Nb; Ti; V). К числу этих моделей относятся модели для расчета кинетики:

- роста зерна аустенита в зависимости от температуры;
- динамической рекристаллизации в зависимости от температуры, размера зерна и скорости деформации;
- роста зерна в зависимости от температуры;
- динамической рекристаллизации в зависимости от температуры, размера зерна аустенита и скорости деформации;
- выделения частиц карбонитридов Nb на дислокациях деформированного аустенита;
- статической рекристаллизации в зависимости от температуры, размера зерна аустенита и параметров деформации с учетом эффектов возврата и индуцированного деформацией выделения частиц карбонитридов Nb.

Разработана математическая модель для расчета напряжения пластического деформирования аустенита в зависимости от температуры, размера зерна и скорости деформации.

3. Получена эмпирическая формула для расчета ЭАСД в зависимости от концентрации практически важных легирующих элементов (C; Mn; Si; Ni; Mo; Cr; Nb; Ti; V), находящихся в твердом растворе.

4. Применён новый физически обоснованный подход к расчету энергий активации процессов диффузионной перестройки решетки аустенита при нормальном росте его зерна и статической рекристаллизации, базирующийся на их связи с ЭАСД. Реализация данного подхода продемонстрировала его эффективность и показала, что энергии активации отмеченных процессов близки к половине ЭАСД, вычисляемой в зависимости от концентрации легирующих элементов в твердом растворе аустенита.

Практическая значимость полученных результатов определяется использованием созданных моделей, а также компьютерной AusEvol+, программы для расчета параметров структуры И энергосиловых параметров горячей прокатки конструкционных и трубных сталей по заданным режимам деформации и изменения температуры.

#### Основные положения, выносимые на защиту:

1. Интегральная модель для описания эволюции структуры аустенита в результате развития совокупности взаимодействующих процессов структурообразования при заданном температурнодеформационном режиме горячей прокатки современных трубных сталей.

2. Результаты исследования процессов структурообразования аустенита при горячей прокатке трубных сталей категории прочности X80, X90 и X100, выполненного с помощью комплекса Gleeble 3800, а также экспериментальные данные количественных исследований полученных структур.

3. Физически обоснованные математические модели процессов формирования структуры аустенита при горячей прокатке сталей с учетом влияния их комплексного легирования элементами замещения (Mn; Si; Ni; Mo; Cr; Nb; Ti; V).

4. Результаты анализа экспериментальных данных по коэффициенту самодиффузии для аустенита разного химического состава и полученная на его базе эмпирическая формула для расчета ЭАСД в зависимости от концентрации практически важных легирующих элементов (C; Mn; Si; Ni; Mo; Cr; Nb; Ti; V), находящихся в твердом растворе.

5. Физически обоснованный подход к расчету энергий активации процессов нормального роста зерна аустенита и его статической рекристаллизации, базирующийся на их связи с ЭАСД, вычисляемой в зависимости от концентрации всех практически важных легирующих элементов сталей в твердом растворе аустенита.

Достоверность результатов. Достоверность результатов экспериментальных исследований обеспечивается их проведением на современном, сертифицированном и аттестованном оборудовании с

практически апробированных использованием методик. Достоверность результатов теоретической части работы определяется применением физически обоснованных корректным подходов к моделей построению математических исследуемых процессов; тщательным отбором достоверных экспериментальных данных, использованных при их калибровке; количественным согласием результатов расчетов с экспериментом, статистической обработкой результатов экспериментов.

Личный вклад соискателя. Автор участвовал в постановке задач диссертации, самостоятельно выполнил все запланированные экспериментальные исследования; участвовал в формулировании математических моделей, разработал и реализовал процедуры их калибровки, а также принимал участие в создании компьютерной программы AusEvol+.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, шести глав, основных результатов и выводов, списка литературы из 112 наименований и 3 приложений. Работа изложена на 216 страницах, содержит 103 рисунка и 27 таблиц.

Апробация результатов работы. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на Международной научно-технической конференции «Современные металлические материалы и технологии» (СММТ'2009, 24-26 июня 2009, СПб); Всероссийском семинаре «Нанотехнологии - производству, 2009» (МИСИС, сентябрь 2009, Москва); Всероссийской межвузовской научно-технической конференции студентов и аспирантов «XXXIX Неделя Науки СПбГПУ» (СПбГПУ, ноябрь, 2010, СПб); XX Уральской школе материаловедов-термистов «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов» (1-5 февраля 2010, Пермь); на XIX Петербургских чтениях по проблемам прочности (март 2010, СПб); Международной конференции «Materials Science and Engineering 2010» (MSE'10, 24-26 августа 2010, Дармштадт, Германия); Международной конференции «Processing & Manufacturing of Advanced Materials» (Thermec'11, август 2011, Quebec City, Canada); Международном семинаре «Summary of the 2012 European Gleeble User's Group Meeting at TU Delft» (апрель 2012, Delft, Netherlands), Международной научно-практической конференции «Инновационные

технологии в металлургии и машиностроении. Уральская научнопедагогическая школа им. проф. А.Ф. Головина».

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 14 печатных работ, 3 из которых – в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** раскрыта актуальность работы, кратко изложено содержание диссертации; сформулированы ее цель и задачи, научная новизна, практическая значимость и основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава диссертации содержит аналитический обзор работ, выполненных в области экспериментального исследования и математического моделирования основных процессов структурообразования аустенита при горячей прокатке, к числу которых относятся рост зерна, возврат, динамическая и статическая рекристаллизация, также индуцированное пластической а деформацией выделение карбонитридов микролегирующих элементов.

Вторая глава посвящена изложению результатов экспериментального исследования роста зерна аустенита в трубных сталях категории прочности X80÷X100 и разработке математической модели для расчета кинетики этого процесса в зависимости от температуры и химического состава сталей. Химические составы исследованных сталей представлены в табл.1.

Таблица 1

Сталь	С	Si	Mn	Cr	Mo	Ni	Al	Cu	Nb	Ti	V	Ν
X80	0.08	0.2	1.47	1	0.19	-	0.04	-	0.042	0.01	0.06	0.006
X90	0.06	0.2	1.7	1	0.2	-	0.03	I	0.045	0.02	0.04	0.005
X100	0.04	0.25	1.9	0.1	0.31	0.45	0.04	0.2	0.050	0.02	0.02	0.006

Химические составы исследованных сталей (масс.%)

Исследования кинетики роста зерна выполнены с использованием модуля Pocket Jaw экспериментального комплекса Gleeble 3800. Перед изотермическими выдержками при температурах

изучения процесса образцы сталей нагревали и выдерживали при температуре 1200°С для обеспечения растворения карбонитридов ниобия. После этого их охлаждали до требуемой температуры испытания, выдерживали заданное время и закаливали со скоростью ~ 40°С/с для получения структур реечного бейнита, травление которых позволяло выявить границы бывших зерен аустенита. Количественный анализ полученных микроструктур проводили на оптическом микроскопе Axio Observer «Carl Zeiss» с системой анализа изображений Thixomet.

Для расчета скорости роста зерна в условиях его торможения частицами выделений использовано уравнение вида:

$$\frac{d\overline{D}(t)}{dt} = M_0 \exp\left(\frac{\beta_{GG} Q_{SD}(Y_{AE})}{R}\right) \exp\left(-\frac{\alpha_{GG} Q_{SD}(Y_{AE})}{RT}\right) \left[\frac{1}{\overline{D}(t)} - \frac{1}{\overline{D}_{lim}}\right], \quad (1)$$

где  $\overline{D}$  – средний размер (диаметр) зерна;  $\overline{D}_{im}$  – предельный размер, при достижении которого рост зерна прекращается из-за его торможения частицами;  $M_0$ ;  $\beta_{GG}$ ;  $\alpha_{GG}$  – эмпирические параметры модели. Как видно из (1) в предлагаемой модели роста зерна энергия активации процесса считается пропорциональной ЭАСД.  $Q_{SD}(Y_{AE})$ , вычисляемой в зависимости от химического состава аустенита:  $Q_{GG}(Y_{AE}) = \alpha_{GG} Q_{SD}(Y_{AE})$ , где  $Y_{AE} = \{y_{C}; y_{Mn}; y_{Si}; y_{Ni}; y_{Cr}; y_{Mo};$  $y_{Nb}; y_{Ti}; y_{V} \}$  – совокупность атомных концентраций  $y_{X}$  легирующих элементов в твердом растворе аустенита. Для расчета ЭАСД в зависимости от химического состава его твердого раствора использована формула:

$$Q_{SD}(Y_{AE}) = 311691 - 278242 (1 - \exp(-0.394y_{\rm C})) + 88752y_{\rm Mn}^{0.31} + 22801y_{\rm Si} - 6490y_{\rm Cr} (2) + 84864y_{\rm Mo}^{0.65} - 38575y_{\rm Ni}^{0.3} - 7298y_{\rm V} + 132594y_{\rm Nb}^{0.263} + 82128y_{\rm Ti}^{0.401} (Дж/моль)$$

где  $y_x$  – атомная концентрация (%). Формула (2) получена в рамках настоящей работы на основании анализа экспериментальных данных по коэффициенту самодиффузии для аустенита различного химического состава (ПРИЛОЖЕНИЕ А).



Рис. 1. Сопоставление расчётных и экспериментальных размеров зерна аустенита для сталей различного химического состава (использованы условные обозначения сталей); <δ> – среднее значение абсолютной величины относительной погрешности.

Калибровка модели роста зерна выполнена на базе экспериментальных данных из литературы 10 сталей с лля содержанием легирующих элементов, изменяющимся в диапазонах: **Mn**(0.3÷1.9); **Si**(0.04÷0.3);  $C(0.04 \div 0.32);$ **Ni** $(0 \div 4)$ ;  $Mo(0 \div 0.5);$ Nb(0÷0.05) (масс.%). Разработанная модель позволяет достичь хорошего количественного согласия с экспериментом не только для (1150÷1250°C), температур данные высоких для которых использованы при ее калибровке, но и для более низких температур  $(1000 \div 1100^{\circ} \text{C})$  (рис.1). В качестве значений параметра  $\overline{D}_{\text{im}}$  выбирали соответствующие асимптотические значения размера зерна, определенные на основании экспериментальных кривых его роста.

**В третьей главе** представлены результаты исследования напряжения пластического течения аустенита изучаемых трубных сталей в зависимости от температуры, скорости деформации и описана разработанная математическая модель для его расчета. Эксперименты выполнены с использованием модуля Hydrawedge комплекса Gleeble 3800 при температурах в интервале 900÷1200°C и скоростях деформации  $\dot{\epsilon} = 0, 1 \div 10c^{-1}$ .

Предложенная в работе модель сопротивления деформации является обобщением модели S.F. Medina. Все параметры

обсуждаемой модели зависят от химического состава стали и представлены в виде степенных функций параметра  $Z = \dot{\epsilon} \exp(Q_d / RT)$ , где  $Q_d -$ эффективная энергия активации процесса деформации, зависящая от химического состава.

Для расчета пиковой деформации в работе предложено новое выражение, позволяющее с хорошей точностью описать большой массив собственных и литературных экспериментальных данных для 18 сталей различного состава:

$$\varepsilon_{p} = 2.71 \times 10^{-3} \left[ 1 + 3.7 \cdot 10^{-4} w_{Nb} \exp\left(\frac{98500}{RT}\right) \right] D_{\gamma 0}^{0.195} Z^{0.154},$$
(3)

где  $D_{\gamma 0}$  – исходный размер зерна аустенита;  $w_{\rm Nb}$  – содержание Nb (масс.%).

Сравнение расчетных кривых деформирования с экспериментальными для сталей X80 и X100 дано на рис.2, из которого видно, что разработанная модель обеспечивает хорошее согласие с экспериментом.



**Рис. 2**. Экспериментальные и расчетные кривые пластического течения аустенита сталей X80 (а) и X100 (б).

В четвёртой главе представлены результаты экспериментального исследования кинетики статической рекристаллизации сталей и описаны разработанные математические модели процесса. Экспериментальная часть работы выполнена для исследуемых трубных сталей и судостроительной стали АБ-1. Исследование кинетики рекристаллизации для практически важных

температур (900÷1150°С для трубных сталей, 800÷1100°С сталь АБ-1) и параметров деформации проведено с использованием модуля Hydrawedge комплекса Gleeble 3800 методом двойного изотермического сжатия с междеформационными паузами разной длительности. Долю рекристаллизованного металла определяли по методу «обратной экстраполяции».

В диссертации разработаны две разные модели статической рекристаллизации, существенно отличающиеся степенью эмпиризма.

В сугубо эмпирической модели для описания кинетики процесса используется уравнение Колмогорова–Джонсона–Мэлла–Аврами:

$$X_{SRX} = 1 - \exp\left[-0.693 \left(\frac{t}{t_{50}}\right)^{n}\right],$$
 (4)

где  $X_{SRX}$  — доля рекристаллизованного объема, а  $t_{50}$  — время рекристаллизации половины объема, расчет которого проводится с использованием выражения:

$$t_{50} = A_{SRX} \varepsilon^{p} \dot{\varepsilon}^{q} D_{\gamma 0}^{s} \exp\left(\frac{Q_{SRX}}{RT}\right).$$
(5)

Важнейшим параметром модели является энергия активации процесса,  $Q_{SRX}$ , которая, в соответствии с экспериментальными данными, сильно зависит от химического состава. Данная энергия представляется в виде:  $Q_{SRX}(Y_{AE}) = \alpha_{SRX}Q_{SD}(Y_{AE})$ , где  $\alpha_{SRX}$  – эмпирический параметр.

Для учета влияния твердорастворного торможения, оказываемого атомами Мо, Nb и Ti («solute drag»—эффект), введена температурная зависимость параметра  $A_{ssx}$ :

$$A_{SRX} \equiv A_{SRX}(T) = A \Big( 1 + \alpha_{Drag}^{Mo}(T) + \alpha_{Drag}^{Nb}(T) + \alpha_{Drag}^{Ti}(T) \Big), \tag{6}$$

где  $\alpha_{Drag}^{Mo}(T)$  – параметр, определяющий вклад элемента X.

Калибровка рассматриваемой модели рекристаллизации проведена на основании базы данных по кинетике процесса для 32 сталей различного систематически варьируемого состава, а также результатов собственных экспериментальных исследований трубных сталей. При этом получено: p = -1.34;

 $q = -0.53; s = 0.71; n = 2.68 \exp(-1900 / RT)$ . Оптимальное значение  $\alpha_{sgy}$  оказалось близким к 0.5.

По рис.3 видно, что разработанная модель позволяет получить хорошее количественное согласие с экспериментом. Обсуждаемая модель содержит меньшее число подгоночных параметров, чем известная модель S.F. Medina, но значительно превосходит ее по точности расчета кинетики рекристаллизации сталей, данные для которых использованы при калибровке обеих моделей.

В рамках описанного сугубо эмпирического подхода сложно создать модель, способную учесть влияние возврата, который предшествует началу статической рекристаллизации и снижает ее движущую силу на протяжении всего времени ее развития. Еще более затруднительно, оставаясь в этих рамках, предложить физически обоснованный способ учета эффекта выделения карбонитридов микролегирующих элементов, индуцированного пластической деформацией, который для современных трубных сталей представляет особый интерес.



**Рис.3.** Сравнение расчётных и экспериментальных данных по характерному времени *t*<sub>50</sub> (а) и величинам *X<sub>SRX</sub>* (б) для 32 сталей.

В связи с отмеченными ограничениями сугубо эмпирической модели в диссертации разработана более сложная физически обоснованная модель, в которой рассматриваются и количественно описываются три взаимодействующих между собой процесса: возврат  $\rightleftharpoons$  рекристаллизация  $\rightleftharpoons$  выделение частиц карбонитридов, индуцированное деформацией. Развитый подход базируется на

результатах более ранних работ, выполненных в данном направлении, и значительно их расширяет.

В данной версии модели имеем:

$$X_{ext}(t) = N_{rex} \left( \int_{0}^{t} M_{GB}^{rex} P_{rex}(\tau) d\tau \right)^{3}, \qquad (7)$$

где  $X_{ext}(t)$  – доля продолженного рекристаллизованного объема;  $N_{rex}$  – объёмная плотность зародышей рекристаллизованных зёрен, зависящая от размера зерна аустенита и параметров деформации;  $M_{GB}^{rex}$  – подвижность границ зерен, зависящая от химического состава;  $P_{rex}(\tau)$  – движущее давление рекристаллизации, определяемое средней плотностью дислокаций и, соответственно, зависящее от скорости протекания возврата.

Разработанный вариант модели рекристаллизации, в которой учитывается эффект возврата, позволяет достичь хорошего согласия с экспериментом. При этом погрешность предсказания экспериментальных значений X<sub>SRX</sub>(t) для 32 сталей различного химического состава составляет 12.3%, что близко к погрешности сугубо эмпирической модели (рис.3б). Модель обеспечивает хорошую точность расчета широком диапазоне изменения скорости в деформации (рис.4а) и размера исходного зерна аустенита (рис.4б).



**Рис. 4.** Сравнение расчётных и экспериментальных данных по кинетике статической рекристаллизации для сталей различного химического состава: a) 0.53C; 0.71Mn; 0.21Si; б) 0.42C; 0.79Mn; 0.27Si; 0.18Mo.

**В пятой главе** представлена модель выделения карбонитридов ниобия на дислокациях деформированного аустенита, а также модель для описания кинетики статической рекристаллизации с учетом влияния возврата и выделения этих карбонитридов, объединяющая разработанные субмодели.

Скорость зарождения карбонитридов ниобия рассчитывается по формуле:

$$\left. \frac{dN}{dt} \right|_{nucl} = N_n Z \ \beta \ \exp\left(-\frac{\Delta G_c}{RT}\right), \tag{8}$$

где N – число частиц в единице объема;  $N_n$  – объемная плотность потенциальных мест зарождения; Z – фактор Зельдовича;  $\beta$  – скорость диффузионно-контролируемого присоединения атомов ниобия к зародышу критического размера;  $\Delta G_c = \frac{4}{3} \pi R_c^2 \gamma_{p/\gamma}$  – термодинамический барьер зарождения ( $R_c$  – радиус критического зародыша;  $\gamma_{p/\gamma}$  – удельная энергия поверхности раздела частица-матрица).

Расчет скорости изменения среднего радиуса частиц  $\overline{R}$  на стадии зарождения выполняется на основании выражения:

$$\frac{d\overline{R}}{dt}\Big|_{nucl} = \frac{D_{Nb}^{eff}}{\overline{R}} \frac{X_{Nb} - X_{Nb}^{eq} \exp\left(\frac{R_0}{\overline{R}}\right)}{\alpha_p X_{Nb}^p - X_{Nb}^{eq} \exp\left(\frac{R_0}{\overline{R}}\right)} + \frac{1}{N} \frac{dN}{dt} \left(R_c^* - \overline{R}\right), \tag{9}$$

где  $X_{Nb}$ ;  $X_{Nb}^{eq}$  — соответственно, фактическая и равновесная концентрации Nb в твердом растворе аустенита (молярные доли);  $X_{Nb}^{p} = 0.5$  — молярная доля атомов ниобия в Nb(C,N),  $\alpha_{p} = V_{a}^{\gamma} / V_{a}^{Nb(C,N)}$  — отношение атомных объёмов в аустените и частице Nb(C,N);  $R_{0} = 2\gamma_{p/\gamma} V_{a}^{Nb(C,N)} / RT$  — капиллярный радиус. В (9)  $R_{c}^{*}$  эффективный критический радиус, который принимается равным  $R_{c}^{*} = (1 + \alpha_{c})R_{c}$ , где  $\alpha_{c} \ll 1$  — параметр модели. При описании роста выделений использовался эффективный коэффициент диффузии атомов ниобия  $D_{Nb}^{eff}$ , рассчитываемый с учетом вклада его диффузии вдоль дислокационных трубок. Переход от стадии роста к стадии коалесценции происходит в момент, когда эффективный критический размер достигает текущего значения среднего размера:  $R_c^* = \overline{R}$ . На данной стадии расчет скорости роста среднего размера и одновременного уменьшения общего числа частиц выполняется согласно следующим формулам:

$$\frac{d\overline{R}}{dt}\Big|_{coars} = \frac{4}{27} \frac{X_{\rm Nb}}{\alpha_p X_{\rm Nb}^p - X_{\rm Nb}^{eq}} \frac{R_0 D_{\rm Nb}^{eff}}{\overline{R}^2} \\
\frac{dN}{dt}\Big|_{coars} = \frac{4}{27} \frac{X_{\rm Nb}}{\alpha_p X_{\rm Nb}^p - X_{\rm Nb}^{eq}} \frac{R_0 D_{\rm Nb}^{eff}}{\overline{R}^3} \left[ \frac{R_0 X_{\rm Nb}}{\overline{R} (X_{\rm Nb}^p - X_{\rm Nb}^{eq})} \left( \frac{3}{4\pi \overline{R}^3} - N \right) - 3N \right].$$
(10)

где erf(x) – функция ошибок.

Расчёт равновесной концентрации ниобия в твердом растворе и движущей силы выделения карбонитрида  $\Delta G_p^{\text{Nb}(C,N)}$  выполняется с использованием полученной в данной работе эмпирической формулы для произведения соответствующих растворимостей с учетом влияния содержания Mn и Si (ПРИЛОЖЕНИЕ Б).

Калибровка модели выполнена на базе экспериментальных литературы кинетике роста частиц Nb(C,N)ланных ИЗ по зарождающихся на дислокациях деформированного аустенита, для двух сталей. На рис.5 представлены результаты моделирования частиц Nb(C,N) и кинетики изменения радиуса их объемной плотности N.



Рис. 5. Результаты моделирования кинетики изменения радиуса частиц Nb(C,N) (а) и их объемной плотности (б) для стали 0.11C; 0.03Nb; 0.1N, деформированной при двух температурах.

Во второй части главы описана интегральная модель статической рекристаллизации сталей, микролегированных Nb, учитывающая влияние возврата и выделения карбонитридов. Схема, представленная на рис.6, иллюстрирует физические механизмы взаимодействия моделируемых процессов и поясняет использованные подходы к их количественному описанию.

Интегральная модель учитывает следующие взаимодействия:

1. Рекристаллизация и выделение частиц карбонитридов. Выделение частиц Nb(C,N) непосредственно сказывается на кинетике рекристаллизации, поскольку падение концентраций ниобия и углерода в твердом растворе аустенита изменяет эффективную подвижность границ рекристаллизованных зерен:  $M_{GB}^{rex}(t) = M_{GB}^{rex}(Q_{SD}(y_c(t); y_N(t); y_X;...); T(t)).$ 



**Рис. 6.** Схема интегральной модели взаимодействующих процессов возврата, рекристаллизации и выделения карбонитридов

Другим важным следствием выделения частиц является изменение движущего давления рекристаллизации, эффективная величина которого  $P_{rev}^{*}(t)$  представляется в виде:

$$P_{rex}^{*}(t) = P_{rex}(\rho_d(t)) - P_Z(t), \qquad (11)$$

где  $P_{Z}(t)$  – давление Зинера,

$$P_Z(t) = \frac{3\gamma_{GB} f(t)}{\overline{R}(t)},$$
(12)

где f(t) – объемная доля частиц Nb(C,N);  $\gamma_{GB}$  – удельная энергия границ рекристаллизованных зерен (эмпирический параметр модели).

2. Возврат и выделение частиц карбонитридов. Образование частиц Nb(C,N) на дислокациях деформированного аустенита приводит к их закреплению и торможению возврата. Скорость возврата снижается с ростом числа узлов, в которых сформировались частицы карбонитрида и становится равной нулю, когда все узлы оказываются занятыми.

Сравнение результатов моделирования кинетики статической рекристаллизации в широком диапазоне температур с данными собственного экспериментального исследования сталей Х90 и Х100 представлено на рис.7, из которого видно, что разработанная модель позволяет достичь хорошего количественного согласия с экспериментом.



**Рис. 7.** Сравнение расчётных и экспериментальных данных по кинетике статической рекристаллизации для сталей Х90 (а) и Х100 (б) при разных температурах

Шестая глава посвящена краткому описанию возможностей компьютерной программы AusEvol+, реализующей разработанную интегральную модель эволюции микроструктуры аустенита при многократной пластической деформации. Программа позволяет проводить моделирующие расчеты микроструктуры аустенита при сложных режимах термо-деформационного воздействия, например, при горячей прокатке или ковке сталей с учетом влияния их комплексного легирования.

работоспособности Для проверки интегральной модели структурообразования была проведена серия экспериментов по физическому моделированию прокатки в черновой группе клетей стана 2000 ОАО «Северсталь». Физическое моделирование процесса использованием было выполнено модуля Pocket Jaw с экспериментального комплекса Gleeble 3800 для четырех сталей: D40S, 09Г2C, S235JR и Ст3Сп. Параметры прокатки выбраны на основе протоколов стана 2000.

На рис.8 приведен режим моделируемой черновой прокатки рассматриваемых сталей и результаты расчета кинетики изменения размера зерна аустенита, остаточной деформации и сопротивления деформированию для стали 09Г2С.



Рис. 8. Режим черновой прокатки для исследуемых сталей (а), результаты расчёта кинетики изменения размера зерна аустенита (б), остаточной деформации (в) и сопротивления деформации (г) для стали 09Г2С.
 – экспериментальный размер зерна.

Проведенная верификация модели показала, что в случае сталей Ст3Сп, 09Г2С и S235JR, для которых размер зерна после прокатки определен с высокой точностью, результаты расчетов отлично согласуются с данными эксперимента (рис.8б). Средняя погрешность предсказания конечного размера зерна аустенита для этих стали не превышает 2%.

**ПРИЛОЖЕНИЕ А** содержит результаты количественного анализа экспериментальных данных по коэффициенту самодиффузии для аустенита различного химического состава.

**В ПРИЛОЖЕНИИ Б** представлены математические модели для расчета произведений растворимостей и температур сольвуса карбонитридов Nb, Ti и V в аустените с учетом содержания Mn и Si.

**ПРИЛОЖЕНИЕ В** содержит описание возможностей разработанной компьютерной программы AusEvol+.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработана интегральная модель для описания эволюции структуры аустенита в результате развития совокупности взаимодействующих процессов структурообразования при заданном температурно-деформационном режиме горячей прокатки, а также реализующая ее компьютерная программа AusEvol+.

2. Выполнено экспериментальное исследование кинетики роста зерна аустенита в зависимости от температуры для трубных сталей X80, X90 и X100. Показано, что данные стали характеризуются низкими скоростями роста зерна, что является следствием как торможения движения межзеренных границ за счет их взаимодействия с не растворившимися частицами нитридов Тi, так и замедляющего эффекта, оказываемого твердым раствором.

3. Получена экспериментальная база данных по зависимости напряжения пластического течения аустенита от деформации при разных температурах и скоростях деформирования для трубных сталей X80, X90 и X100.

4. Проведено экспериментальное исследование кинетики статической рекристаллизации аустенита в зависимости от температуры, степени и скорости пластической деформации для

трубных Х80, Х90, Х100 и судостроительной АБ-1 сталей. Показано, трубных сталей что В случае индуцированное пластической деформацией выделение частиц карбонитридов миколегирующих элементов существенно тормозит процесс рекристаллизации вплоть до его полной остановки. Часть полученных экспериментальных данных (стали Х80, Х90 и Х100) использована при калибровке разработанных математических молелей статической рекристаллизации. Данные для стали АБ-1 послужили основой верификации моделей.

5. На основании количественного анализа экспериментальных данных по коэффициенту самодиффузии для аустенита разного химического состава, полученных методом меченых атомов, найдена формула для расчета энергии активации самодиффузии в твердом растворе аустенита сложного состава. Полученная формула позволяет с высокой точностью рассчитывать энергию с учетом содержания основных легирующих элементов (C; Mn; Si; Ni; Cr; Mo; Nb; Ni; V) и использована при построении моделей роста зерна и статической рекристаллизации.

6. Разработаны математические модели для количественного описания:

- кинетики роста зерна аустенита в зависимости от химического состава стали и температуры;
- динамической рекристаллизации в зависимости от химического состава стали, температуры и параметров деформации;
- напряжения пластического течения сталей в зависимости от химического состава, температуры и скорости деформирования.

7. Разработана физически обоснованная количественная модель, позволяющая одновременно описывать взаимодействующие процессы возврата, рекристаллизации и выделения карбонитридов, а также прогнозировать размер статически рекристаллизованного зерна.

8. Выполнено физическое моделирование горячей прокатки ряда сталей в соответствии с режимами их прокатки на стане 2000 ОАО «Северсталь». На основании полученных данных по размерам зерна аустенита на разных стадиях моделируемой прокатки выполнена верификация разработанной интегральной модели его структурообразования.

#### Основные результаты диссертации опубликованы в работах:

- Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов Д.Ф., Соколов С.Ф. Модификация модели HSMM для повышения точности расчета механических свойств сталей, прокатанных на стане 2000 ОАО «Северсталь» // Сб. трудов: «Современные металлические материалы и технологии». – СПб. – 2009. – с. 471–483.
- Vasilyev A.A., Kolbasnikov N.G., Sokolov S.F., Sokolov D.F. Modeling of Static Recrystallization Kinetics in Complexly Alloyed Austenite // Electronic version of the poster presentation at the MSE'2010 Conference: 24–26 August 2010, Darmstadt, Germany: http://tmslab.spbstu.ru/tmslab/Poster/Poster\_5.pdf
- 3. Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов Д.Ф., Соколов С.Ф. Моделирование микроструктуры и механических свойств стального листа после прокатки на стане 2000 ОАО «Северсталь» // Вопросы материаловедения. – 2010. – № 3 (63). – с. 16–27.
- Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов С.Ф., Соколов Д.Ф., Хлусова Е.И. Моделирование статической рекристаллизации современных трубных сталей // Сб. трудов: «XIX Петербургские чтения по проблемам прочности». – СПб. – 2010. – с. 292–295.
- Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов С.Ф., Соколов Д.Ф. Расчёт энергии активации самодиффузии в легированном аустените // Сб. трудов: «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов»: 1-5 февраля 2010 г. – Пермь. – 2010. – с. 99.
- Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов Д.Ф., Соколов С.Ф. Моделирование микроструктуры и механических свойств горячекатаных низколегированных сталей // Сб. трудов: «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов»: 1-5 февраля 2010 г. – Пермь. – 2010. – с. 100.
- Соколов Д.Ф., Соколов С.Ф. Исследование процессов рекристаллизации при горячей деформации трубных сталей // Сб. трудов: « XXXIX Неделя Науки СПбГПУ». – СПб. – 2010. – с. 71–72.
- Соколов Д.Ф., Соколов С.Ф., Адигамов Р.Р. Корректировка структурных моделей программы HSMM // Сб. трудов: «Неделя Науки СПбГПУ». – СПб. – 2010. – с. 75–76.
- Rudskoy A., Vasilyev A., Kolbasnikov N., Sokolov S., Sokolov D. Experimental Investigation and Modeling of Austenite Microstructure Evolution Processes Occurring in Line-pipe Steels under Hot Rolling // HUTNAD. – Spolka. – 2011. – V.78. – № 5. – p. 344–475.
- 10. Васильев А.А., Соколов С.Ф., Колбасников Н.Г., Соколов Д.Ф. О влиянии легирования на энергию активации самодиффузии в γ-железе // ФТТ. 2011. Т.53. №11. с. 2086–2093.
- Vasilyev A., Rudskoy A., Kolbasnikov N., Sokolov S., Sokolov D. Physical and Mathematical Modeling of Austenite Microstructure Evolution Processes Developing in Line-pipe Steels under Hot Rolling // Mater. Sci. Forum. – 2012. – V.706-709. – p. 2836–2841.
- 12. Васильев А.А., Колбасников Н.Г., Соколов С.Ф., Соколов Д.Ф., Хлусова Е.И. Экспериментальное исследование и моделирование кинетики статической рекристаллизации трубных сталей // Вопросы материаловедения. 2012. № 3 (63). с. 64–74.